



TITLE:

第三元素添加による新奇規則化合物相Fe-Pdナノ粒子の創製

AUTHOR(S):

松本, 憲志

CITATION:

松本, 憲志. 第三元素添加による新奇規則化合物相Fe-Pdナノ粒子の創製. 京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 2018, 2017: 4-4

ISSUE DATE:

2018-03

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/230707>

RIGHT:

第三元素添加による新奇規則化合物相 Fe-Pd ナノ粒子の創製
Creation of Novel Fe-Pd Ordered Alloy Nanoparticles by Introducing Third Element

京都大学 化学研究所 物質創製化学研究 精密無機合成化学
松本 憲志

研究成果概要

今年度はまだほとんど計算を実行することができなかったため、記載できる成果はない。今後の研究計画としては、本年度に引き続き、下記に記すように新奇相の形成駆動力の解明を行う予定である。

ナノサイズ化や典型元素添加によって、準安定な金属結晶相の形成が多数報告されている。しかし、それらの準安定相は既知の結晶構造を有していることが大半である。Fe-Pd 系合金の場合、他の合金相でも確認されたことのない未踏の結晶相を含めた数々の準安定相が理論的には提案されているものの、実際は安定相である $L1_0$ -FePd 相と 1_2 -FePd₃ 相の金属間化合物、および 1 -FePd 固溶合金相のみが報告されている。本研究では、第三元素の添加により、Fe-Pd の副格子があたかも 1_0 -FePd 相と fcc-Pd 相のユニットセルが c 軸に交互配列したような新奇 FePd₃ 規則化合物ナノ粒子の創製に成功し、その規則相が報告例のない配列秩序を有することを明らかにした。そこで、本システムで利用可能な計算ソフトウェアである CASTEP を利用し、新奇 FePd₃ 規則化合物相のギブス自由エネルギーを明らかにし、この新奇相の熱力学的安定性を明らかにするとともに、期待され得る物性を明らかにするために電子状態密度の解明を行っていきたい。これらを明らかにすることで、機能性材料である新奇相に関する新たなメカニズムの構築が実現できるかもしれない。